

## HL 27: GaN Preparation and Characterization

Time: Tuesday 14:00–16:15

Location: H15

HL 27.1 Tue 14:00 H15

**Defect distributions at III-nitride interfaces from ab-initio-based thermodynamic data** — ●CHRISTOPH FREYSOLDT, BJÖRN LANGE, and JÖRG NEUGEBAUER — Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf

The electrical, optical, and other properties of III-nitrides for optoelectronic devices are critically determined by dopants, vacancies, and other point defects. These defects have been extensively studied in experiment and theory. However, real devices contain inhomogeneities such as interfaces or electric fields, which affect the point defect distribution. We employ a multiscale approach to treat the interplay of local composition and macroscopic fields. The formation energies and charge transition levels of individual defects are obtained from density functional theory. These thermodynamical parameters then determine the local concentration in a continuum model for the device scale. However, defect concentrations and electric fields sensitively depend on each other and may vary over several orders of magnitude. In addition, defects may react to form complexes with different charge-transition characteristics, which makes these reactions explicitly potential-dependent. Instead of resorting to a time-demanding simulation of the equilibration process, we have developed an efficient method to compute the thermodynamic equilibrium directly. We apply our approach to the hydrogen distribution around Mg-induced inversion domain boundaries in p-GaN. Our results show that the enhanced affinity of Mg<sub>3</sub>N<sub>2</sub> towards H<sup>+</sup> produces significant space charge zones, even though the total amount of hydrogen in the boundary is very low.

HL 27.2 Tue 14:15 H15

**Ab-initio based growth simulations of III-Nitride nanowires** — ●LIVERIOS LYMPERAKIS and JÖRG NEUGEBAUER — Computational Materials Design department, Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Max-Planck-Str. 1, 40237 Düsseldorf

III-Nitride based nanowires (NWs) have recently emerged as potential candidates for novel nanodevice applications. A prerequisite for improved device features is to achieve a better understanding of the atomic scale mechanisms that control the growth of these nanostructures. A key step is a quantitative description of the adatom kinetics taking place on the top and the side facets. In a recent *ab-initio* study we have investigated the thermodynamics and adatom kinetics on the non-polar GaN surfaces [1]. Computing the potential energy surfaces for Ga adatoms revealed a strong anisotropy for the diffusion barriers for both *a*- and *m*-plane non-polar surfaces. Based on this insight and using the *ab-initio* computed kinetic parameters we developed a mesoscale growth model. This model consistently incorporates temperature and realistic growth geometries and allows to numerically solve the surface diffusion problem. Based on these calculations we provide a detailed discussion on the dependence of the NW growth rate on temperature, geometry as well as on the substrate.

[1] L. Lymperakis and J. Neugebauer, PRB **79**, 241308(R) (2009).

HL 27.3 Tue 14:30 H15

**Processing and contacting of free standing nanorod arrays** — ●RICHARD NEUMANN, ÜNSAL SÖKMEN, STEPHAN MERZSCH, SÖNKE FÜNDLING, SHUNFENG LI, GERHARD PALM, HERGO-HEINRICH WEHMANN and ANDREAS WAAG — Institut für Halbleitertechnik, Technische Universität Braunschweig, 38092 Braunschweig

Nanorods are a hot topic in today's research. Large surfaces are excellent preconditions for gas sensors. The decreased thermal conductivity with good electric conductivity gives a chance for high efficiency thermoelectric devices. Furthermore nanorods show less dislocations than bulk material, giving rise to applications like high quality LEDs with an enhanced light out-coupling due to a smoother refractive index transition or due to photonic crystal effects in which they could be arranged in.

All these possibilities have one thing in common - they need electrical contacts on free standing nanorods, and therefore, suitable processing techniques. The three dimensionality of the structure generates problems that can't be overcome with conventional two dimensional processing used in semiconductor techniques. The first approach we are presenting is planarization giving the possibility to use conventional techniques afterwards. We show different materials with the possibility to level structures with a height of up to 6  $\mu\text{m}$ .

As a second approach we show a new way to contact every single nanorod simultaneously without the need of planarization and lithography. This approach gives the possibility to contact single nanorods without encapsulating the surface.

HL 27.4 Tue 14:45 H15

**Elektrische Messungen selbstorganisierter GaN Nanosäulen** — ●G. KUNERT, C. KRUSE, T. ASCHENBRENNER, S. FIGGE, D. HOMMEL, J. KALDEN, K. SEBALD und J. GUTOWSKI — Institute für Festkörperphysik, Universität Bremen, Otto-Hahn-Allee 1, 28359 Bremen

In den letzten Jahren wurden die Eigenschaften von GaN-basierten Nanosäulen umfangreich untersucht. Die Herstellungsmethode des selbstorganisierten Wachstums ist wegen der daraus resultierenden sehr guten Kristallqualität (FWHM  $D_0X=1,2\text{meV}$ ) anderen Verfahren teilweise überlegen. Der Prozess verwendet in r-Richtung ( $1\bar{1}02$ ) geschnittenen Saphirsubstrate.

Zur Herstellung der Kristalle wird das Substrat in einem ersten Schritt mittels metallorganischer Dampfphasenepitaxie nitridiert. Dabei bilden sich AlN-Inseln auf der Substratoberfläche. In einem zweiten Schritt wird das Wachstum der Nanosäulen mittels Molekularstrahlepitaxie durchgeführt. Das Verfahren führt zu Nanosäulen welche um  $28^\circ$  zur Oberflächennormalen geneigt sind, sowie einer kompakten, zweidimensionalen Schicht, welche die Nanokristalle umschließt. Es wurden n-, p-Dotierungen, sowie p-n-Übergänge der Nanokristalle realisiert.

Eine Methode zur elektrischen Kontaktierung von Nanosäulen-Ensembles wird präsentiert. Elektrische Messungen zeigen ohmsche Kontaktcharakteristiken für beide Dotierungen. Bei 5V angelegter Spannung konnten Stromdichten von  $10\text{A cm}^{-2}$  (n-dotiert) bzw.  $16\text{mA cm}^{-2}$  (p-dotiert) erreicht werden. Diodenkenlinien von n-p-dotierten Nanosäulen werden diskutiert.

HL 27.5 Tue 15:00 H15

**Elektrische Untersuchungen an AlN/AlGaIn-Strukturen für LEDs auf Si(111)** — K.-M. GÜNTHER, ●H. WITTE, A. ROHRBECK, P. SAENGAKEW, J. BLÄSING, A. DADGAR und A. KROST — Institut für Experimentelle Physik, Otto-von-Guericke-Universität-Magdeburg, Magdeburg, Germany

AlGaIn ist aufgrund seiner variablen Bandlücke von 3,4 eV (GaN) bis 6,2 eV (AlN) ein sehr attraktives Material für optoelektronische Bauelemente für den UV-Bereich. Für diese Anwendung werden jedoch Schichten mit hoher Qualität benötigt. Um die strukturellen Eigenschaften einer AlGaIn/GaN-LED auf Si(111) zu verbessern, wurde zur Defektreduktion eine Niedrigtemperatur (LT)/Hochtemperatur (HT)-AlN-Multilayer-Struktur als Anpassschicht zum Si-Substrat verwendet. Diese LED-Strukturen wurden mittels temperaturabhängiger IU- und CV-Messungen und mittels Admittanz- und Photoleitungsspektroskopie detailliert untersucht. Es wurden Hinweise auf Grenzflächendefekte in der LT-AlN/HT-AlN-Multilayer und innerhalb der AlGaIn/GaN-Struktur gefunden. Innerhalb des Quantenwells (QWs) zeigen CV-Messungen negative differentielle Widerstands- und Kapazitätsverläufe, die durch Tunnelprozesse innerhalb des QWs erklärt werden können. Die Ergebnisse werden in Hinblick auf den Einfluss der Grenzflächendefekte und der Transportvorgänge im QW auf die elektrischen und optischen Eigenschaften der LED-Strukturen diskutiert.

HL 27.6 Tue 15:15 H15

**Doping modulation in GaN investigated by cross-sectional scanning tunneling microscopy** — HOLGER EISELE<sup>1</sup>, LENA IVANOVA<sup>1</sup>, SVETLANA BORISOVA<sup>2</sup>, MARIO DÄHNE<sup>1</sup>, MOMME WINKELNKEMPER<sup>1</sup>, and ●PHILIPP EBERT<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin, Hardenbergstr. 36, 10623 Berlin, Germany — <sup>2</sup>Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich, Germany

Cross-sectional scanning tunneling microscopy (XSTM) of III-V semiconductor structures on cleavage planes is a powerful technique providing a direct access to the atomically resolved geometric and electronic structure of semiconductor interfaces. Unfortunately, thus far XSTM has been only applied successfully to zincblende type materials. Here we investigated for the first time the imaging mechanisms of a Si doping modulation in wurtzite-structure GaN by cross-sectional scanning

tunneling microscopy. The Si doping modulation gives rise to a voltage and tip dependent height modulation of at least 0.04 nm. The origin of the height modulation in constant-current STM images is traced to two mechanisms. A doping-induced modulation of the band edge energies yields a voltage dependent electronic contrast and an additional mechanical relaxation of the doping-induced strain at the cleavage surface is responsible for a voltage independent modulation of 0.035 nm.

HL 27.7 Tue 15:30 H15

**Röntgenographische Qualitäts- und Homogenitätsuntersuchungen an GaN Schichten auf Silizium** — ●STEPHANIE FRITZE<sup>1</sup>, JÜRGEN BLÄSING<sup>1</sup>, OLIVER SCHULZ<sup>2</sup>, ARMIN DADGAR<sup>1</sup> und ALOIS KROST<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg — <sup>2</sup>AZZURRO Semiconductors AG, Magdeburg

Die Heteroepitaxie von GaN auf Siliziumsubstraten stellt eine leistungsfähige und kostengünstige Alternative zum Wachstum auf anderen Heterosubstraten (Saphir, SiC) für die Herstellung effizienter LEDs dar. Es wurden dicke rissfreie GaN Schichten auf Silizium untersucht, die durch den Einsatz von spannungsreduzierenden LT-AlN-Zwischenschichten eine hohe kristalline Qualität und Homogenität besitzen. Zur schnellen, strukturellen Mikro-Charakterisierung haben wir ein neues Röntgendiffraktometer mit einer Ortsauflösung entwickelt. Die Anlage besteht im Wesentlichen aus einer Drehanodenröhre, einem gekrümmten Johannsson-Monochromator für eine konvergente Strahloptik, einer justierbaren Schneidblende, sowie einem großen Flächendetektor. Im Vergleich zu herkömmlichen Systemen wird die Messzeit bei einer lateralen Auflösung von 10  $\mu\text{m}$  um ca. einen Faktor 100 verkürzt. Mit dieser Anlage wurde an hochwertigem und rissfreiem c-GaN auf Si(111) mit 100 mm Durchmesser die Kristallqualität mittels konventioneller HRXRD und auch in in-plane Geometrie untersucht. Zusätzlich wurden optische Krümmungsmessungen durchgeführt und den röntgenographischen Topographiemessungen gegenübergestellt. Zuletzt wurde die laterale Homogenität der Al-Konzentration in den Zwischenschichten und dem Unterbau nachgewiesen.

HL 27.8 Tue 15:45 H15

**Analyse und Interpretation von in-situ Krümmungsmessungen beim Wachstum von AlInN/GaN-Braggreflektoren** — ●CHRISTOPH BERGER, PASCAL MOSER, ARMIN DADGAR, JÜRGEN BLÄSING und ALOIS KROST — Institut für Experimentelle Physik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Die in-situ Messung der Waferkrümmung hat sich mittlerweile zu einer wirksamen Methode entwickelt, um den Verspannungszustand und die Zusammensetzung aufgewachsener Schichten schon während des Wachstums zu bestimmen. Wir zeigen anhand von Krümmungsmessungen, welche beim Wachstum von Braggreflektoren auf der Basis von AlInN/GaN durchgeführt wurden, wie die Durchbiegung des Substrates durch verschiedene Beiträge beeinflusst wird. Zunächst wurde die anfängliche Krümmung der Substrate untersucht, wobei sich eine starke Anisotropie innerhalb der Oberfläche zeigte. Ebenso wurde die Biegung des reinen Substrats beim Erwärmen quantitativ bestimmt, welche durch einen vertikalen Temperaturgradient verursacht wird. Darauf folgend konnten diese Beiträge zur Krümmung aus den Messungen entfernt werden, womit nur noch die Anteile übrig blieben, die durch die Gitterfehlpassung und die verschiedenen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Schicht und Substrat zustande kommen. Die gemessenen Änderungen der Krümmung bei Temperaturänderungen werden mit berechneten Werten verglichen und es wird gezeigt, dass ein gitterangepasstes Wachstum der AlInN-Schichten erreicht wurde, wodurch keine zusätzliche Spannung in den Schichten induziert wird.

HL 27.9 Tue 16:00 H15

**Effect of Mg codoping on Europium( $\text{Eu}^{+3}$ ) implanted GaN** — ●JAYANTA KUMAR MISHRA<sup>1</sup>, TORSTEN LANGER<sup>1</sup>, UWE ROSSOW<sup>1</sup>, KIRILL TRUNOV<sup>2</sup>, RÜDIGER SCHOTT<sup>2</sup>, ANDREAS WIECK<sup>2</sup>, and ANDREAS HANGLEITER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Angewandte Physik, TU Braunschweig — <sup>2</sup>Angewandte Festkörperphysik, Ruhr-Universität Bochum, Germany

Rare earth ions implanted into GaN are promising for optoelectronic applications. They show luminescence in the visible range while the luminescence from this material system is sharper as well as independent of temperature due to intra 4f transition of rare earth ions. To improve the emission efficiency we implanted Europium in GaN codoped with Mg at dose range from  $10^9 \text{cm}^{-2}$  to  $10^{14} \text{cm}^{-2}$  with an energy of 100keV. The red emission from  $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$  of europium was remarkably enhanced by Mg codoping. At low temperature this line was split into some additional lines due to the host crystal field effect. We observed higher intensity for lower Mg doped GaN but simultaneously relatively broader lines than that of higher Mg doped GaN. We derived the activation energy for both cases and found that it is increased from 4.4meV for high Mg concentration to 8.18meV for low Mg concentration in GaN.